

Assimilação de dados variacional aplicado a equação da onda

Helaine C. M. Furtado¹, Haroldo F. Campos Velho², Elbert E. N. Macau²

¹Programa de Doutorado em Computação Aplicada

²Laboratório de Computação e Matemática Aplicada

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

Av dos Astronautas, 1.758 - Jd. Granja - CEP: 12227-010 - S. J. dos Campos - SP - Brasil

{helaine.furtado,haroldo,elbert}@lac.inpe.br

***Abstract.** Description of a physical phenomenon by means of differential equations has errors involved, since the mathematical model is always an approximation of reality. For an operational prediction system, one strategy to improve the prediction is to add some information from the real dynamics into mathematical model. This additional information consists of observations on the phenomenon. However, the observational data insertion should be done carefully, for avoiding a worse performance of the prediction. Technical data assimilation are tools to combine data from physical-mathematics model with observational data to obtain a better forecast.*

1. Introdução

As técnicas de Assimilação de Dados tornaram-se uma ferramenta de extrema importância para modelos numéricos de previsão, seja em circulação atmosférica [Kalnay 2003, Daley 1993], em circulação oceânica [Bennett 2002], e mais recentemente tem sido utilizada para a previsão de clima espacial [Harter et al. 2008, Scherliess et al. 2004]. No entanto, descrever esses fenômenos a partir de equações diferenciais é uma atividade passível de erro, uma vez que, o modelo matemático é sempre uma aproximação da realidade. Um modo de melhorar esta descrição é adicionando informações ao modelo. Estas informações consistem de observações sobre o fenômeno que se deseja modelar. Contudo, ao se adicionar observações ao modelo o problema modelado torna-se um problema sobredeterminado, ou seja, não é possível determinar uma solução que satisfaça o modelo e as observações simultaneamente.

A alternativa para a solução do problema é combinar de modo eficiente as observações com o modelo matemático, por meio da utilização de técnicas de assimilação de dados, que podem ser baseadas na Teoria da Estimção (como: Filtro de Kalman [Kalman 1960], Filtro de Partículas [Gordon et al. 1993, Chorin and Krause 2004]); baseadas no Cálculo Variacional [Talagrand and Courtier 1987]; ou ainda, baseadas em Inteligência Artificial, com o uso de Redes Neurais Artificiais [Nowosad et al. 2000].

O objetivo deste trabalho é aplicar o método do *Representante*, desenvolvido por [Bennett 2002] no modelo de onda linear em uma dimensão, que é modelo de Equação Diferencial Parcial (EDP). A equação é resolvida por aproximação numérica.

2. Equação da Onda

A equação governante é dada pela propagação da onda linear a seguir:

$$\frac{\partial \eta_F}{\partial t} + c \frac{\partial \eta_F}{\partial x} = F(x, t) \quad (1)$$

em que η é o deslocamento, c é a constante de velocidade de fase, F é uma forçante externa, t é o tempo e x é o espaço. O *subscript F* indica a solução avançada, isto é, a solução *a priori*. A Equação 1 pode ser interpretada também como a equação da convecção, em que η é a concentração e c é o coeficiente de convecção. A condição inicial, que é periódica, utilizada na integração da equação da onda é a solução analítica da equação KdV (Korteweg-de Vries) avaliada em $t = 1$, dada por:

$$\eta(x, 1) = \eta_0 \frac{1}{\cosh^2[(x - v)/\Delta]} \quad (2)$$

em que η_0 é a amplitude do *soliton*, v é a velocidade de fase do *soliton* e Δ o tamanho da escala do *soliton*, sendo:

$$\Delta = \sqrt{\frac{12\beta}{\alpha\eta_0}} \text{ e } v = c + \frac{\alpha\eta_0}{3}$$

Na tabela 1 consta os parâmetros usados na integração do modelo. Na Figura 1 apresenta-se os gráficos da equação da 1. Na Figura 1 tem-se a evolução temporal para a equação da onda nos instantes inicial e em $t = 150$.

Tabela 1. Parâmetros usados na integração da equação da onda.

Parâmetro	Valor
η_0	-60 m
c	$2,42 \text{ m}^{-1}$
α	$-1,62 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$
β	$1,46 \times 10^5 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
Δ	1340 m
v	$2,75 \text{ m s}^{-1}$

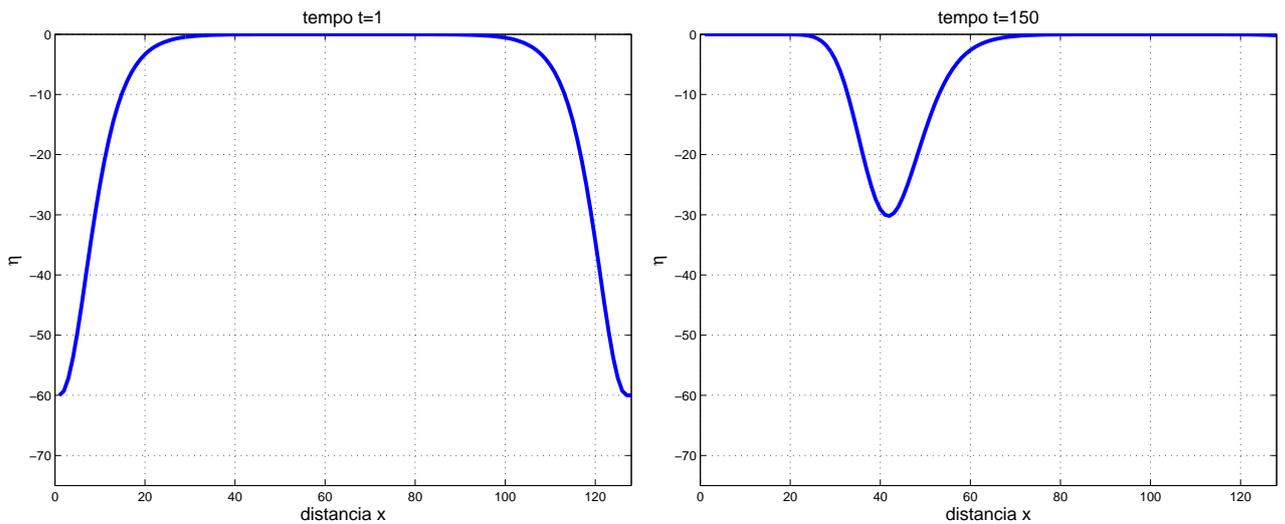


Figura 1. Evolução temporal da equação 1. (lado esquerdo) perfil inicial; (lado direito) Integração numérica no instante $t = 150$.

Assimilação de dados consiste em combinar dados provenientes de medidas (observações) para melhorar a previsão do modelo. O problema consiste em determi-

nar uma solução por meio de uma construção ponderada realizada pelo ajuste de mínimos quadrados entre os dados de observações e dados do modelo físico-matemático.

3. Dados

Assume-se um número finito de observações coletadas dentro de um domínio espacial ($0 \leq x \leq L$) e temporal ($0 \leq t \leq T$). Essas observações são medidas pontuais e imperfeitas das variáveis independentes $\eta(x, t)$ coletadas em M pontos no espaço e no tempo (x_m, t_m) , isto é:

$$d_m = \eta(x_m, t_m) + \varepsilon_m \quad 1 \leq m \leq M \quad (3)$$

em que $\eta(x, t)$ é o campo de deslocamento real, que não é conhecido e ε_m representa o erro de medida. Dado que a forçante, a condição inicial e os dados contêm erros, não se pode esperar que o modelo seja perfeitamente consistente com os dados. Então, espera-se que:

$$\eta_F(x, t) \neq d_m \quad 1 \leq m \leq M \quad (4)$$

De modo análogo para o caso discreto, tem-se:

$$d_m = \eta_{p_m}^{k_m} + \varepsilon_m \quad 1 \leq m \leq M \quad (5)$$

4. Técnica Variacional

O deslocamento real deve satisfazer às Equações 6 e 7:

$$\frac{\partial \eta_F}{\partial t} + c \frac{\partial \eta_F}{\partial x} = F(x, t) + f(x, t) \quad 0 \leq x \leq L \quad (6)$$

$$\eta(x, 0) = I(x) + i(x) \quad 0 \leq t \leq T \quad (7)$$

em que $f(x, t)$ representa o erro na forçante, $i(x)$ o erro na condição inicial. Na condição de contorno, que é periódica $\eta(0, t) = \eta(L, t)$ com $0 \leq t \leq T$ não se admitiu erro. Portanto, as Equações 3, 6 e 7 correspondem aos *residuais de observação, modelagem e condição inicial*, respectivamente.

Sejam uma forçante $F(x, t)$, uma condição inicial $I(x)$ e uma condição de contorno periódica, para qualquer escolha de $F(x, t) + f(x, t)$ e $I(x) + i(x)$, existe uma única solução real $\eta(x, t)$ [Bennett 2002]. No entanto, os campos de erros ($f(x, t)$, $i(x)$ e ε_m) não são conhecidos. De modo arbitrário neste ponto, define-se uma *solução ótima* $\hat{\eta}(x, t)$ para ser a solução correspondente ao menor $f(x, t)$, $i(x)$ e ε_m em um sentido de mínimos quadrados ponderados. Assim, o objetivo consiste em procurar o mínimo do funcional de penalidade quadrático a seguir:

$$J[\eta(x, t)] \equiv W_f \int_0^T \int_0^L \left\{ \frac{\partial \eta}{\partial t} + c \frac{\partial \eta}{\partial x} - F(x, t) \right\}^2 dt dx + W_i \int_0^L \{\eta(x, 0) - I(x)\}^2 dx + w \sum_{m=1}^M \{\eta(x_m, t_m) - d_m\}^2 \quad (8)$$

em que W_f , W_i e w são pesos positivos e constantes. Estes pesos são operadores inversos de covariâncias *a priori* dos erros da dinâmica (modelo), da condição inicial e das

observações, respectivamente [Chua and Bennett 2001]. O cálculo do funcional 8 é feito por meio do cálculo das variações. Define-se $\hat{\eta}(x, t)$ como um extremo local, isto é, corresponde ao menor valor da função custo para o menor $f(x, t)$, $i(x)$ e ε_m . Ressalta-se que como o funcional de penalidade é quadrático, o extremo local é um extremo global e o funcional é não negativo, então o seu extremo é um mínimo global. Veja ilustração no gráfico da Figura 2.

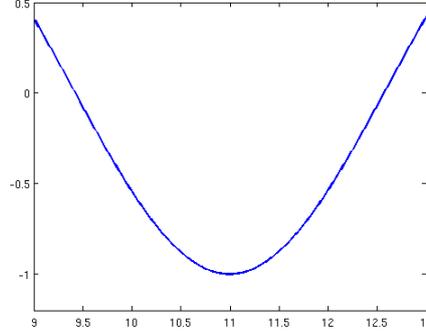


Figura 2. Representação gráfica de um funcional de penalidade quadrático não negativo. Assim, de acordo com cálculo das variações tem-se $J[\hat{\eta}]$ dado por:

$$J[\hat{\eta}] = W_f \int_0^T \int_0^L \left\{ \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} + c \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial x} - F(x, t) \right\}^2 dt dx + W_i \int_0^L \{ \hat{\eta}(x, 0) - I(x) \}^2 dx + w \sum_{m=1}^M \{ \hat{\eta}(x_m, t_m) - d_m \}^2 \quad (9)$$

sendo para $J[\hat{\eta} + \delta\eta]$, com $\delta\eta$ uma perturbação em torno da variável η , tem-se:

$$J[\hat{\eta} + \delta\eta] = W_f \int_0^T \int_0^L \left\{ \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} + \frac{\partial \delta\eta}{\partial t} + c \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial x} + c \frac{\partial \delta\eta}{\partial x} - F \right\}^2 dt dx + W_i \int_0^L \{ \hat{\eta}(x, 0) + \delta\eta(x, 0) - I(x) \}^2 dx + w \sum_{m=1}^M \{ \hat{\eta}(x_m, t_m) + \delta\eta(x_m, t_m) - d_m \}^2 \quad (10)$$

Subtraindo as equações 9 de 10 e desprezando a variações de segunda ordem tem-se:

$$\delta J = 2W_f \int_0^T dt \int_0^L dx \left\{ \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} c \frac{\partial \delta\eta}{\partial x} - F(x, t) \right\} \left\{ \frac{\partial \delta\eta}{\partial t} + c \frac{\partial \delta\eta}{\partial x} \right\} + 2W_i \int_0^L dx \{ \hat{\eta}(x, 0) - I(x) \} \delta\eta(x, 0) + 2w \sum_{m=1}^M \{ \hat{\eta}(x_m, t_m) - d_m \} \delta(x_m, t_m) + O(\delta\eta)^2 \quad (11)$$

Portanto, tem-se a primeira variação para o funcional de penalidade 8 dado pela Equação 11. Uma vez definida a variação do funcional, o próximo passo é determinar a equação de Euler-Lagrange associada. Isso é feito na próxima seção.

4.1. Equação de Euler-Lagrange

Considera-se a primeira variação dada pela Equação 11, define-se o residual ponderado como:

$$\lambda(x, t) = W_f \left\{ \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} + c \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial x} - F(x, t) \right\} \quad (12)$$

Usando a definição do residual 12 e dividindo 11 por 2 e distribuindo-se o primeiro integrando, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\delta J}{2} = \int_0^T dt \int_0^L dx \lambda \left\{ \frac{\partial \delta \eta}{\partial t} \right\} + \int_0^T dt \int_0^L dx \lambda \left\{ c \frac{\partial \delta \eta}{\partial x} \right\} + W_i \int_0^L dx \{ \hat{\eta}(x, 0) - I(x) \} \delta \eta(x, 0) + \\ w \sum_{m=1}^M \{ \eta(x_m, t_m) - d_m \} \delta \eta(x_m, t_m) + O(\delta \eta)^2 \end{aligned} \quad (13)$$

Se $\hat{\eta}(x, t)$ é um extremo local de J , então $\delta J = O(\delta \eta)^2$. Assim, a soma dos termos restantes deve ser zero e procura-se encontrar o campo $\hat{\eta}(x, t)$ que força δJ à $O(\delta \eta)^2$ indiferentemente do campo $\delta \eta(x, t)$. Então, se expressa todas as variações de $\eta(x, t)$ inteiramente em termos de $\delta \eta(x, t)$, isto é, não parecerá $\frac{\partial \delta \eta}{\partial t}$, $\frac{\partial \delta \eta}{\partial x}$ ou $\delta \eta(x_m, t_m)$.

Usando a propriedade da função Delta de Dirac¹ tem-se:

$$\begin{aligned} w \sum_{m=1}^M \{ \eta(x_m, t_m) - d_m \} \delta \eta(x_m, t_m) = \\ \int_0^T dt \int_0^L dx \sum_{m=1}^M \{ \eta(x_m, t_m) - d_m \} \delta \eta(x, t) \delta(x - x_m) \delta(t - t_m) \end{aligned} \quad (15)$$

em que o segundo e o terceiro δ denota a função Delta de Dirac.

Então, o valor de $\eta(x, t)$ que origina os coeficientes de $\delta \eta$, $\delta \eta(x, T)$ e $\delta \eta(x, 0)$ para desaparecer $\hat{\eta}(x, t)$ é um extremo de J . Definindo-se esses coeficientes iguais a zero, tem-se:

$$-\frac{\partial \lambda}{\partial t} - c \frac{\partial \lambda}{\partial x} + w \sum_{m=1}^M \{ \eta(x_m, t_m) - d_m \} \delta(x - x_m) \delta(t - t_m) = 0 \quad (16)$$

com $0 \leq x \leq L$ e $0 \leq t \leq T$

$$\lambda(x, T) = 0 \quad (17)$$

$$-\lambda(x, 0) + W_i \{ \hat{\eta}(x, 0) - I(x) \} = 0 \quad (18)$$

E finalmente, o residual ponderado já definido:

$$\lambda(x, t) = W_f \left\{ \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} + c \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial x} - F(x, t) \right\} \quad (19)$$

¹A função Delta de Dirac é dada por:

$$F(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) \delta(x - a) dx, \text{ onde } \delta(x - a) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq a, \\ \infty & \text{se } x = a. \end{cases} \quad (14)$$

Rearranjando, as equações de Euler-Lagrange para um extremo local $\hat{\eta}$ do funcional de penalidade, $J[\eta]$ pode ser escrito como um problema “*backwards*” também denominado de *Equação Adjunta*:

$$-\frac{\partial \lambda}{\partial t} - c \frac{\partial \lambda}{\partial x} = -w \sum_{m=1}^M \{\hat{\eta}(x_m, t_m) - d_m\} \delta(x - x_m) \delta(t - t_m) \quad (20a)$$

$$\lambda(x, T) = 0 \quad (20b)$$

$$\lambda(0, t) = \lambda(L, t) \quad (20c)$$

O problema “*forwards*” é dado por:

$$\frac{\partial \hat{\eta}}{\partial t} + c \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial x} = F(x, t) + \frac{\lambda(x, t)}{W_f} \quad (21a)$$

$$\hat{\eta}(x, 0) = I(x) + \frac{\lambda(x, 0)}{W_f} \quad (21b)$$

$$\hat{\eta}(0, t) = \hat{\eta}(L, t) \quad (21c)$$

Das equações em 21 tem-se que a melhor estimativa para F e I é dado por:

$$\hat{f}(x, t) \equiv W_f^{-1} \lambda(x, t) \quad \text{e} \quad \hat{i}(x, 0) \equiv W_f^{-1} \lambda(x, 0) \quad (22)$$

De posse das equações adjuntas 20 e da Equação 21 para modelo avançado, introduz-se o método *representante*.

4.2. Método Representante

Deseja-se desacoplar as equações de EL (Euler-Lagrange), então permite-se soluções sequenciais do problema *adjunto* ou *backward* e o problema *forward*. O denominado *representante-adjunto* e funções *representantes* facilitam este desacoplamento. Existem M funções *representantes*, uma para cada escalar de dados (observações), e estas são denotadas por $r_m(x, t)$ com $1 \leq m \leq M$. A m -ésima função *representante* tem um *representante-adjunto* satisfazendo a equação adjunta, exceto forçado apenas com um único, impulso localizado em uma posição do m -ésimo dado escalar:

$$-\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} - c \frac{\partial \alpha_m}{\partial x} = \delta(x - x_m) \delta(t - t_m) \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq t \leq T \quad (23a)$$

$$\alpha_m(x, T) = 0 \quad (23b)$$

$$\alpha_m(0, t) = \alpha_m(L, t) \quad (23c)$$

Observa-se a mudança da variável $\lambda_m(x, T)$ para $\alpha_m(x, T)$. Isso é para indicar a diferença entre a forçante e também para indicar a dependência dos *representantes-adjunto* sobre a localização espaço tempo do m -ésimo dado escalar. Desde que haja impulso, a Equação 23a pode ser integrada para trás com a condição final 23b produzindo o *representante-adjunto* $\alpha_m(x, t)$.

O *representante* satisfaz a equação *forward*, isto é, a Equação 21a, exceto pela substituição do campo adjunto sobre o lado direito da Equação 23a com o campo *representante-adjunto* e com a estimativa *a priori* da forçante ou a condição inicial.

$$\frac{\partial r_m}{\partial t} + c \frac{\partial r_m}{\partial x} = \frac{\alpha_m(x, t)}{W_f}, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq t \leq T \quad (24a)$$

$$r_m(x, 0) = \frac{\alpha_m(x, 0)}{W_i}, \quad 0 \leq x \leq L \quad (24b)$$

$$r_m(x, 0) = r_m(L, T), \quad 0 \leq t \leq T \quad (24c)$$

A solução ótima é assumida como sendo a soma da estimativa *a priori* e uma combinação linear dos *representantes*, matematicamente expressado por:

$$\hat{\eta}(x, t) = \eta_F(x, t) + \sum_{m=1}^M \beta_m r_m(x, t) \quad (25)$$

em que β_m são constantes não conhecidas. Observa-se que, a resposta da solução ótima para a forçante $F(x, t)$ e a condição inicial $I(x)$ é efetuada pela solução *forward* $\eta_F(x, t)$, enquanto que os termos no somatório do *representante* é uma sequência de “correções” para cada dado de observação. Na Figura 3 apresenta-se o fluxograma do método e na Tabela 2 o algoritmo do método do representante.

Tabela 2. Algoritmo representante para o modelo de onda linear.

Algoritmo: Representante em uma dimensão

1. Calcule $\eta_F(x, t)$ pela integração numérica da Equação 1
 2. Calcule a inovação \mathbf{h} , de acordo com:

$$h = \sum_{m=1}^M (d_m - \eta_F(x_m, t_m))$$
 em que: \mathbf{d}_m representa o vetor de observações.
 3. Calcule o representante-adjunto α_m de acordo com a Equação 23a.
 4. Calcule o representante $r_m(x, t)$ para $1 \leq m \leq M$ de acordo com a Equação 24a.
 5. Calcule a matriz de covariância

$$r_m(x_j, t_j), \text{ com } m = 1, 2, \dots, M \text{ e } j = 1, 2, \dots, M \Rightarrow \mathbf{R}_{M \times M}$$

$$\mathbf{P} = (\mathbf{R} + \mathbf{w}^{-1} \mathbf{I})$$
 6. Determine os coeficientes da expansão do incremento de análise ρ .

$$\rho = \sum_{m=1}^M \beta_m r_m, \quad \mathbf{b} = [\beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_m]^T$$
 resolvendo o sistema linear:

$$\mathbf{Pb} = \mathbf{h}, \quad \mathbf{h} = [h_1 \quad h_2 \quad \dots \quad h_m]^T$$
 7. Calcule a análise dada pela equação a seguir:

$$\hat{\eta}(x, t) = \eta_F(x, t) + \sum_{m=1}^M \beta_m r_m(x, t)$$
-

5. Resultados Preliminares

A solução para o modelo da onda dado pela equação 1 é apresentado na Figura 4. Essa solução corresponde ao melhor ajuste de $f(x, t)$ e $i(x, 0)$ mostrados nas figuras 5 e 6. Essas figuras foram geradas com os seguintes parâmetros:

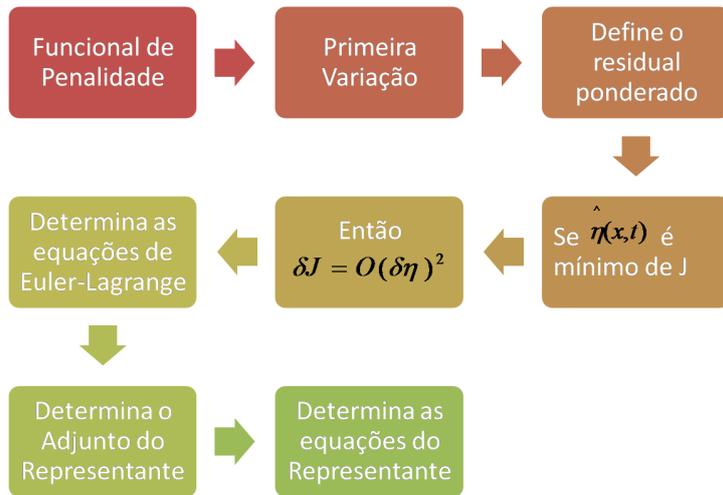


Figura 3. Esquema do processo do método do representante.

$$dx = 100 \times 10^3 \text{ m}, dt = 86,4 \times 10^3 \text{ segundos e } c = 1 \text{ ms}^{-1}.$$

As observações usadas são sintéticas e foram assimiladas a cada 24 horas no mesmo ponto de grade.

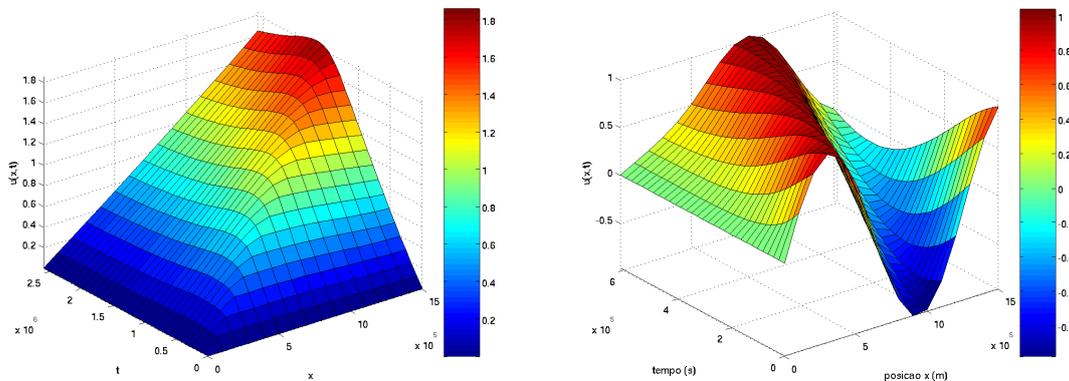


Figura 4. Evolução da variável de estado do modelo da onda linear com $F(x, t) = 0,000001$: (direita) com c. i. zero; (esquerda) c. i. $sen(x)$.

Outro modo de analisar o resultado do método de assimilação é por meio do valor do funcional de penalidade estimado, que é apresentado na tabela 3 a seguir:

Tabela 3. Valor do funcional de penalidade para a equação da onda.

experimento	\hat{J}_{mod}	\hat{J}_{obs}	\hat{J}
1	0,081922	0,003048	0,084965
2	0,092906	0,003389	0,096295

em que $\hat{J} = \hat{J}_{mod} + \hat{J}_{obs}$ e o experimento 1 corresponde à assimilação do modelo com condição inicial zero e o experimento 2 a condição inicial é $sen(x)$.

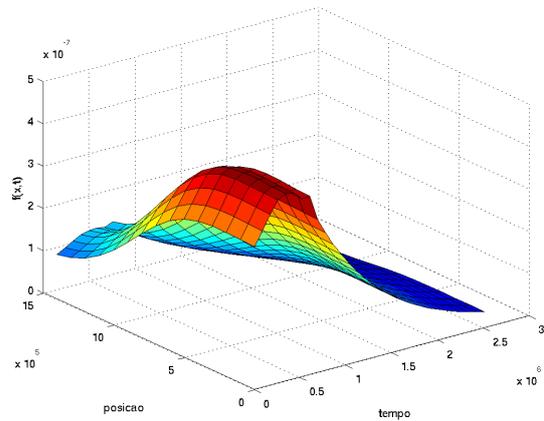
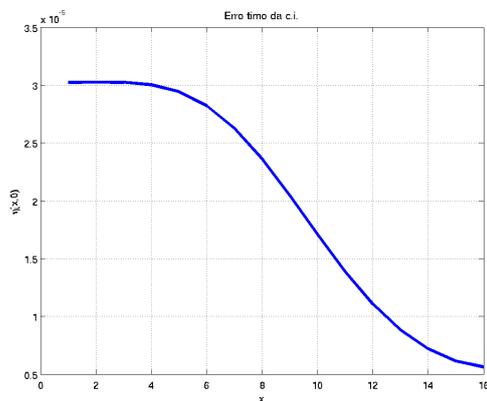


Figura 5. Gráfico com a melhor ajuste para os erros da propagação do modelo com c. i. zero: (direita) condição inicial; (esquerda) forçante do modelo.

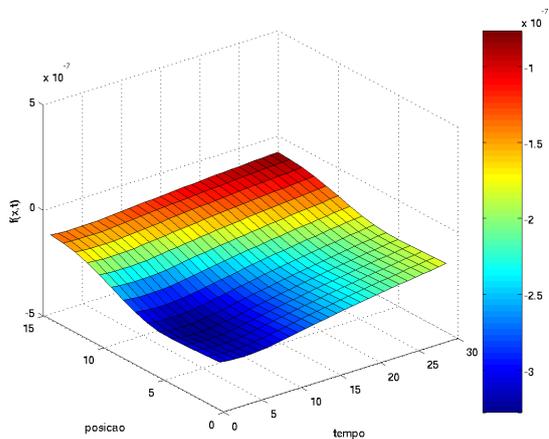
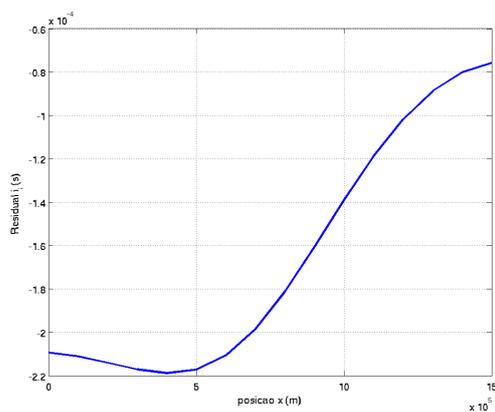


Figura 6. Gráfico com a melhor ajuste para o erro da c. i. e da forçante para o modelo 1D integrado no tempo com c. i. $sen(x)$.

6. Considerações Finais

O método abordado neste trabalho mostrou-se eficiente no processo de assimilação de dados. A metodologia foi avaliada com o modelo de onda em uma dimensão. As observações foram assimiladas no mesmo ponto de grade, no entanto, em tempos diferentes, isto é, a cada 24 h foi inserida uma observação, o que se pode denominar de assimilação de dados variacional em quatro dimensões. Os resultados foram satisfatórios, dado o valor do funcional de penalidade reduzido obtido e apresentado na seção anterior na Tabela 3.

A perspectiva de trabalho futuro é utilizar redes neurais artificiais para emular a metodologia apresentada nesse trabalho.

Referências

- Bennett, A. F. (2002). *Inverse Modeling of the Ocean and Atmosphere*. Cambridge University Press, New York, 1 edition.
- Bennett, A. F. (2004). Linear one-d imensional problem. Notas de aula.

- Chorin, A. J. and Krause, P. (2004). Dimensional reduction for a bayesian filter. *PNAS*, 101(42):15013–15017.
- Chua, B. S. and Bennett, A. F. (2001). An inverse ocean modeling system. *Ocean Modelling*, 3:137–165.
- Daley, R. (1993). *Atmospheric data analysis*, volume 3. Cambridge University Press, New York.
- Gordon, N. J., Salmond, D., and Smith, A. (1993). Novel approach to nonlinear/non-gaussian bayesian state estimation. *IEE Proceedings*, 140(2):107–113.
- Harter, F. P., Rempel, E. L., de CAMPOS VELHO, H. F., and Chian, A. (2008). Application of artificial neural networks in auroral data assimilation. *Journal of Atmospheric and Solar - Terrestrial Physics*, 70(10):1243–1250.
- Kalman, R. E. (1960). A new approach to linear filtering and prediction problems. *Journal of Basic Engineering*, (82):35–45.
- Kalnay, E. (2003). *Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability*. Cambridge University Press, New York, 2 edition.
- Nowosad, A., Campos Velho, H., and Rios Neto, A. (2000). Neural network as a new approach for data assimilation. In *Congresso Brasileiro de Meteorologia*, volume 1, pages 3078–3086, Rio de Janeiro, (Brasil). Proceedings in CD-ROM (paper code PT00002).
- Scherliess, L., Schunk, R. W., Sojka, J. J., and Thompson, D. C. (2004). Development of a physics-based reduced state kalman filter for the ionosphere. *Radio Science*, 39(RS1S04). doi:10.1029/2002RS002797.
- Talagrand, O. and Courtier, P. (1987). Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc*, 113:1311–1328.